

Тематический раздел: Биохимические исследования.
Подраздел: Молекулярное моделирование.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 13-35-7-73

Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
“Структура и динамика молекулярных систем”. Яльчик-2013.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 16 июля 2013 г. УДК 577.29.

Моделирование взаимодействия фосфолипидной мембраны с дефензинами растительного происхождения

© Хайрутдинов⁺ Булат Имамутдинович, Ермакова* Елена Андреевна
и Зуев Юрий Федорович

Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: khayrutdinov@yahoo.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дефензин, фосфолипидные мембраны, молекулярный докинг.

Аннотация

Метод молекулярного докинга применен для исследования взаимодействия растительных дефензинов с фосфолипидным бислоем. Сравнительный анализ взаимодействия шести дефензинов, отличающихся зарядом и распределением зарядов по поверхности белка, с поверхностью мембраны показал, что дефензины слабо взаимодействуют с поверхностью мембраны, основной вклад в энергию взаимодействия дает электростатическое взаимодействие, а также сольватационный и гидрофобный эффекты. Специфичность взаимодействия проявляется в различной ориентации белка относительно поверхности мембраны.